

## 事前評価報告書

Advisory Board Meeting 開催日：平成17年7月28, 29日

評価委員：（敬称略、アルファベット順）

Prof. Masuo Aizawa (Tokyo Institute of Technology), Prof. Fritz Aldinger (Max Planck Institute for Metals Research), Prof. Akio Etori (Edogawa University), Prof. Jean Etourneau (Institut de Chimie de la Matière Condensée de Bordeaux), Prof. Colin Humphreys (University of Cambridge), Dr. Tetsuro Ohashi (National Traffic Safety and Environment Laboratory), Dr. Leslie E. Smith (National Institute of Standards and Technology), Prof. Marcel Van de Voorde (European Commission Research), Dr. Stan Williams (Quantum Science Research, Hewlett-Packard), Prof. Hiroaki Yanagida (University of Tokyo)

|             |   |
|-------------|---|
| 課題名         | 新機能探索ナノシミュレーション手法の開発  |
| 研究責任者の所属・氏名 | 計算材料科学研究センター 大野 隆央  |
| <b>【項目】</b> | <b>評価結果</b>   |
| コメント及びアドバイス | <ul style="list-style-type: none"> <li>・新機能探索ナノシミュレーションはナノファブ리케이션において絶対に欠くことのできないプロジェクトである。本研究は、ナノテクノロジー分野における個別の研究分野というよりも、ナノテクノロジー分野で他のプロジェクトを理論的に支援するのに不可欠なプロジェクトである。</li> <li>・非常に重要なプロジェクトであるが、国際的な共同研究が必須である。計算技術は実験研究者にはすでに有用であるが、本研究の目的はより高い次元のものである。</li> <li>・現象の解明は第一段階であり、最終段階は予言、予想にあるので更なる努力を期待する。</li> <li>・理論とシミュレーションに関する米国DOEプログラムに対する基準として、基礎エネルギー科学レポートがある。</li> <li>・提案された研究は独創的とは言えない。より良い、論理的なプロジェクトがオックスフォード大学やカリフォルニア大学バークレー校にあったように思う。</li> <li>・本研究、とりわけ高効率触媒の研究に関する側面、は非常に困難な研究分野である。最新シミュレーション手法の研究者と実験研究者の間のオープンな共同研究が研究の質を高めるために必要である。</li> <li>・目標の幾つかは、アルゴリズムの開発以上のものを必要としており、新理論が必要でもある。独創性を高めるためにも、外国人を含む優れた理論家と共同研究をするなど、基礎理論グループとのより強い連携が必要である。</li> </ul> |
| 評価点         | S, A-, A+, S-, A, A, A, A+, B, A  |
| 総合評価点※      | A   |

※評価点の点数は10(S), 9(S-), 8(A+), 7(A), 6(A-), 5(B+), 4(B), 3(B-), 2(C+), 1(C)とする。総合評価点は評価委員の点数の平均点(小数点第二位以下四捨五入)をXとすると、S:X=10, S-:9≤X<10, A+:8≤X<9, A:7≤X<8, A-:6≤X<7, B+:5≤X<6, (以下同じ考え方)・・・とする。